

科学研究

科研动态

科研机构

学术活动

科技奖励

仪器设备共享平台

科研动态

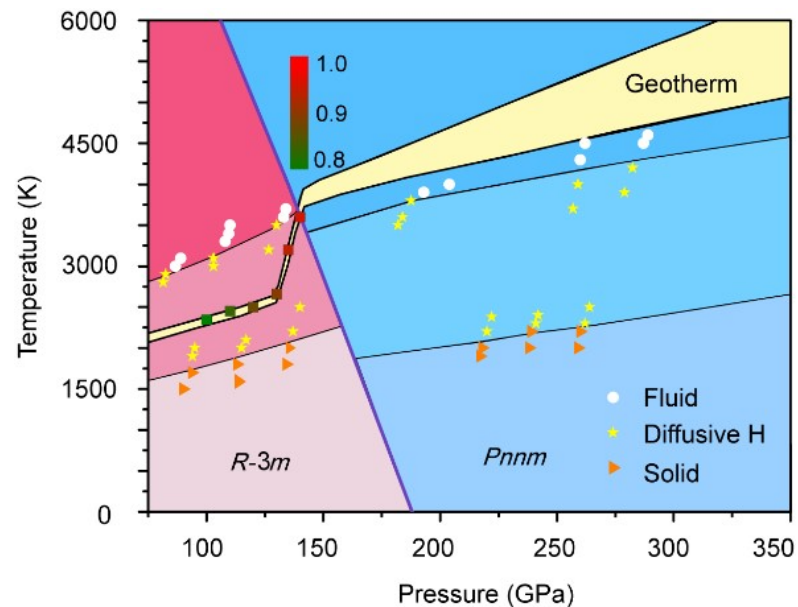
首页 > 科学研究 > 科研动态 > 正文

我院刘寒雨教授研究成果发表在《国家科学评论》

时间: 2021-09-10 点击: 704

近日，马琰铭教授团队在高压下氢氦化合物的研究方向取得新进展。研究成果以“Direct H-He Chemical Association in Superionic FeO₂H₂He at Deep-Earth Conditions”为题，于2021年9月2日在线发表于National Science Review杂志上。

一方面，氢（H）和氦（He）是宇宙中含量最高的两种元素，也是众多行星内部的重要组成元素，但由于He核外电子具有稳定的满壳层电子结构，He难与H等元素发生化学反应。另一方面，近期的研究表明FeO₂矿物可能存在于下地幔，而且分别可与H和He发生化学反应而形成稳定的矿物，这预示FeO₂和H与He可能发生化学反应形成新矿物。因此预测Fe-O-H-He在高压下的晶体结构不仅有助于发现地球内部新型矿物，还有助于研究H和He的化学关联作用。基于课题组前期自主研发的粒子群智能结构预测方法和软件CALYPSO，马琰铭教授团队预测了在高压下稳定的新型FeO₂H₂He矿物，相图研究表明该矿物可能存在于地球深部。分子动力学计算预示该矿物在高温高压下呈现超离子态，即H离子具有类液体行为。电子性质分析揭示了该矿物中存在接近于氢键强度的H-He化学关联。这不仅为H和He之间的化学关联研究提供了新平台，而且为研究地球内部和其他行星内部可能存在的H-He混溶物提供了新思路。



FeO₂H₂He在高温高压下的相图。黑色实线表示相边界；实心三角、五角星和圆分别表示固体、超离子态和流体；实心方块表示FeO₂H₂He的存在几率；黄色区域表示地球内部温压区域。

本文第一作者为吉林大学计算方法与软件国际中心张车荣博士，本文通讯作者为吉林大学刘寒雨教授、吉林大学马琰铭教授和美国内华达大学拉斯维加斯分校陈长风教授。该工作得到了国家自然科学基金、吉林大学科学技术创新研究团队的资助和吉林大学高性能计算中心的支持。

研究详情请见原文：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwab168>

上一条：[我院黄晓丽教授研究成果发表在《物理评论快报》](#) 下一条：[我院研究成果发表在中国化学会旗舰新刊《CCS Chemi...](#)